

УДК 621.378:551.508

Сравнительный анализ устойчивых к выбросам сигнала методов определения количественного состава многокомпонентных газовых смесей

Городничев В. А.^{1,*}, Антонюк Т. К.¹,
Белов М. Л.¹, Назаров В. В.¹

*gorod@bmgту.ru

¹МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

Статья посвящена задаче определения концентраций газовых компонент многокомпонентной газовой смеси из многоспектральных лазерных измерений робастными методами решения системы уравнений лазерного газоанализа в случае стационарных многокомпонентных газовых смесей с перекрывающимися спектрами поглощения газов смеси. Результаты математического моделирования показывают, что использование робастной оценки, основанной на использовании функции невязки для решения уравнений лазерного газоанализа, позволяет в условиях выбросов измеряемого сигнала значительно уменьшить погрешность определения концентраций компонент газовых смесей.

Ключевые слова: лазер, газоанализ, многокомпонентные газовые смеси, сравнительный анализ, робастные методы

Введение

Для экологического мониторинга атмосферы и оперативного контроля выбросов различных источников загрязнений требуется создание высокочувствительных быстродействующих газоанализаторов, способных контролировать содержание в атмосферном воздухе газовых загрязнителей.

Лазерные методы являются наиболее перспективными для оперативного дистанционного и локального газоанализа многокомпонентных загрязнений атмосферы [1-3].

Одной из проблем, возникающих при использовании лазерных методов газоанализа, является неустойчивость результатов определения количественного состава газов при контроле многокомпонентных смесей в условиях реальных шумов измерений. Это вызывает необходимость применения специальных алгоритмов обработки результатов лазерных измерений.

c_j - концентрация j -ой газовой компоненты смеси;

N - полное число газовых компонент в анализируемой смеси.

В матричной форме система уравнений (1) лазерного газоанализа имеет вид

$$W\vec{x} = \vec{k}_a + K\vec{c} = \vec{y}, \quad (2)$$

где

W - матрица системы (1) размерностью $M \times M$;

\vec{x} - M -мерный искомый вектор (N компонент этого вектора соответствуют концентрациям газов);

\vec{k}_a - M -мерный вектор коэффициентов неселективного поглощения;

K - матрица коэффициентов поглощения компонент газовой смеси размерностью $M \times N$;

\vec{c} - N -мерный вектор концентраций газов;

\vec{y} - M -мерный вектор приведенных измеряемых сигналов (показателей поглощения исследуемой смеси).

Неизвестными величинами в системе уравнений (1) являются концентрации c_j и коэффициенты неселективного поглощения $k_a(\lambda_i)$.

Величины $k_a(\lambda_i)$ слабо зависят от длины волны. Для устранения их влияния при определении концентрации каждого газа измерения выполняются на паре лазерных длин волн: λ_{on} - длине волны, на которой поглощение исследуемым газом максимально, λ_{off} - длине волны, на которой поглощение исследуемым газом практически отсутствует. Длины волн λ_{on} и λ_{off} выбирают расположенными попарно (для каждого газа) достаточно близко. Поэтому обычно считают, что для каждой пары длин волн λ_{on} и λ_{off} коэффициенты k_a можно положить равными константе. В этом случае из M спектральных каналов, необходимых для зондирования газовой смеси, информация $M/2$ каналов требуется для определения коэффициентов k_a .

Трудность решения системы уравнений (1) заключается в том, что правая часть уравнения всегда известна со случайной ошибкой, обусловленной погрешностями измерения, шумами аппаратуры и т.п. В этих условиях попытки непосредственно обратить систему уравнений (1) приводят к тому, что найденный обратный оператор не обладает свойством устойчивости и малые вариации данных измерений приводят к большим вариациям искомым величин. Выход из этой трудности заключается в использовании алгоритмов обработки, основанных на методах решения некорректных математических задач (см., например, [3-6]).

В настоящее время для определения концентраций газов в многокомпонентных смесях по данным многоспектрального измерений (при одном измерении на каждой длине волны) эффективно используются метод поиска квазирешений, байесовский метод или метод регуляризации Тихонова с применением различных способов (как

детерминистических, так и статистических) выбора параметра регуляризации (см., например, [3,7,8]).

Если смесь стационарная и существует возможность проведения серии измерений на каждой длине волны, то можно использовать гораздо более простой метод определения концентраций газов - метод наименьших квадратов (МНК).

Пусть c_j^l - концентрация j -ой газовой компоненты смеси определенная (стандартным методом решения системы (1) линейных алгебраических уравнений) по результатам l -ого измерения, n - число измерений в серии, \hat{c}_j - оценка концентрации j -ой газовой компоненты смеси, определенная методом наименьших квадратов.

Введем функцию невязки

$$E(d) = \sum_{l=1}^n [c_j^l - \hat{c}_j]^2. \quad (3)$$

Значение \hat{c}_j , минимизирующее функцию невязки $E(d)$, будет искомой оценкой концентрации j -ой газовой компоненты смеси, определенной методом наименьших квадратов.

Оценки, полученные методом наименьших квадратов, являются эффективными, если погрешности измерений распределены по нормальному закону. Однако на практике часто нормальность закона распределения погрешностей нарушается. Нарушения нормальности закона распределения могут приводить к значительной потере эффективности оценок, полученных методом наименьших квадратов [9,10].

Особенно большая потеря эффективности оценок, полученных методом наименьших квадратов, происходит при наличии даже небольшой доли выбросов. На практике большим выбросам соответствуют измерения, реальная погрешность которых значительно превосходит приписываемое им среднеквадратическое отклонение, причем априорно ни реальная величина таких погрешностей, ни моменты появления выбросов не известны [9,10].

Работ, посвященных задаче количественного лазерного анализа многокомпонентных газовых смесей в условиях выбросов измеряемого сигнала, на сегодняшний день нет. Поэтому актуальным является определение наиболее эффективных (обеспечивающих наименьшие погрешности газоанализа) и устойчивых к выбросам измеряемых сигналов методов восстановления (из многоспектральных лазерных измерений) количественного состава многокомпонентных газовых смесей.

2. Робастные методы определения количественного состава многокомпонентных стационарных газовых смесей

При наличии больших выбросов необходимо применять робастные (устойчивые) методы оценивания [9-12], позволяющие значительно снизить влияние на оценку больших выбросов и получить приемлемую итоговую оценку искомых параметров.

Существуют разные робастные методы оценивания [9,10]. Запишем функцию невязки $E(d)$ в более общем (чем формула (3)) виде

$$E(d) = \sum_{l=1}^n \rho(c_j^l - \hat{c}_j). \quad (4)$$

Здесь $\rho(x)$ - выпуклая, симметричная, положительная функция.

Общий подход к выбору функции $\rho(x)$ основан на том, что оценка доставляющая минимум функции невязки (4), должна обладать робастностью по отношению к большим выбросам и «не портить» измерения, не являющиеся большими выбросами. Например, функция $\rho(x)$ должна быть (желательно) квадратичной при малых значениях $|x|$ и менее возрастающей по сравнению с квадратичной функцией при больших значениях $|x|$.

В качестве конкретных функций, порождающих конкретные робастные оценки, могут быть взяты различные функции [10-12]:

- замена квадратичной формы в функции (3) невязки $E(d)$ на L_p -форму

$$\rho(x) = |x|^p, \quad (5)$$

где $1 \leq p \leq 2$;

- оценка Хьюберта (Huber)

$$\rho(x) = \begin{cases} x^2 / 2, & |x| < K \\ -K^2 / 2 + K|x|, & |x| > K \end{cases}, \quad (6)$$

где K - параметр Хьюберта;

- оценка Германа-Маклара (German-Maclure)

$$\rho(x) = \frac{x^2 / 2}{1 + x^2}; \quad (7)$$

- оценка Уэлша (Welsch)

$$\rho(x) = \frac{c^2}{2} [1 - \exp(-(\frac{x}{c})^2)]; \quad (8)$$

$$- \rho(x) = \arctg|x|; \quad (9)$$

$$- \rho(x) = \arctg(|x|^{2,431}); \quad (10)$$

$$- \rho(x) = \ln(|x| + 1); \quad (11)$$

$$- \rho(x) = 1 - \exp(-|x|); \quad (12)$$

$$- \rho(x) = \frac{|x|}{1 + |x|}. \quad (13)$$

Численное нахождение самой робастной оценки (при решении задачи минимизации $\hat{E}(d)$) можно осуществить любыми стандартными методами.

4. Математическое моделирование

Для сравнительного анализа робастных методов определения количественного состава многокомпонентных стационарных газовых смесей и определения наиболее эффективных методов восстановления количественного состава многокомпонентных газовых смесей из многоспектральных лазерных измерений было проведено математическое моделирование. Моделирование проводилось для газовых смесей с числом компонент от 4 до 6.

Считалась, что газовая смесь стационарная и для определения количественного состава газов в смеси проводится n измерений (n задавалось от 2 до 6). Концентрации газов при единичных измерениях c_j^l находились стандартным методом решения матричного уравнения (2). Для нахождения концентраций газов по n измерениям использовались функции невязки (5) – (13).

Найденные значения концентраций газов \tilde{c}_j сравнивались с исходными (заданными) значениям концентраций c_j и определялась погрешность определения концентраций газов

$$\delta_j = \frac{|c_j - \tilde{c}_j|}{c_j}.$$

Шум измерения задавался с пуассоновским распределением, моделирующим редкие выбросы, с параметром распределения $\lambda = 0,1$. Измеряемый сигнал \tilde{y}_k в k -ом спектральном канале моделировался как

$$\tilde{y}_k = y_k(1 + a\xi_{\tilde{y}_k}),$$

где

y_k - сигнала в случае отсутствия шума измерения;

a - вес (в величине сигнала) пуассоновского шума $\xi_{\tilde{y}_k}$.

На рисунках 1-6 приведены примеры результатов математического моделирования для шестикомпонентной смеси этилен-фреон-12-гидразин-аммиак-метанол-этилакрилат. Для контроля количественного состава смеси были использованы следующие спектральные каналы измерения: 10P14, 10P10, 10R18, 10R22, 10P22, 10P28, 10R6, 10R12, 9P14, 9P20, 9R14, 9R22 (они соответствуют дискретно перестраиваемому по длине волны лазеру на углекислом газе [2]). Концентрации газов задавались равными: 10^{-4} ; $2 - 4,6 \cdot 10^{-3}$; $3 - 8 \cdot 10^{-3}$; $4 - 8,5 \cdot 10^{-3}$; $5 - 6,6 \cdot 10^{-3}$; $6 - 9,2 \cdot 10^{-3}$. Число измерений n полагалось равным 6.

На рисунках 1-6 для пуассоновского шума приведены средние (по серии из 1000 шумовых реализаций) погрешности δ (в процентах) определения концентрации всех компонент газовой смеси (для веса a пуассоновского шума равного 0,25)).

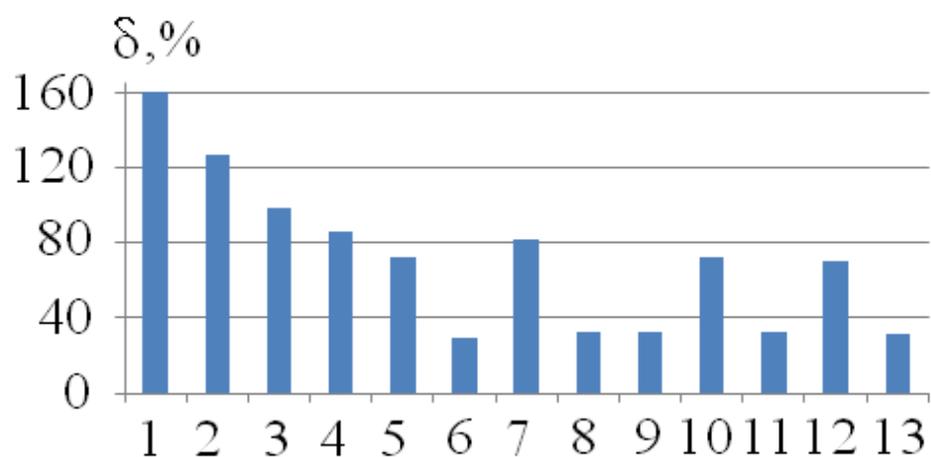


Рис.1 Погрешности определения концентрации этилена. Пуассоновский закон распределения шума.

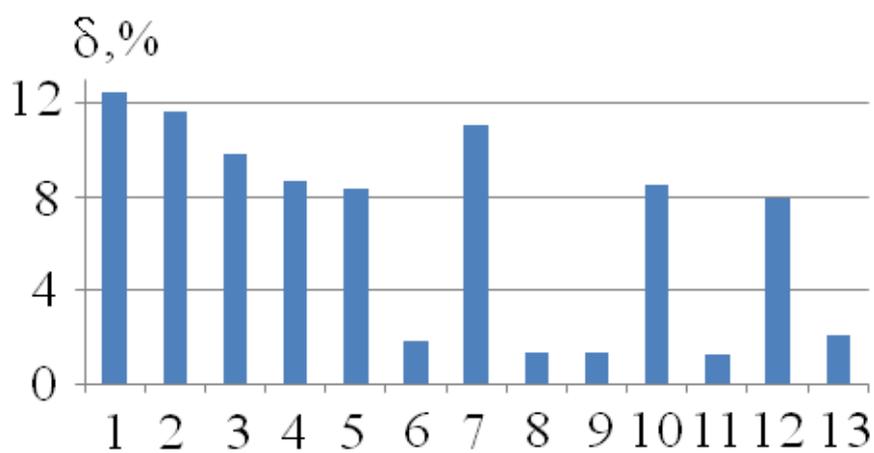


Рис.2 Погрешности определения концентрации фреона-12. Пуассоновский закон распределения шума.

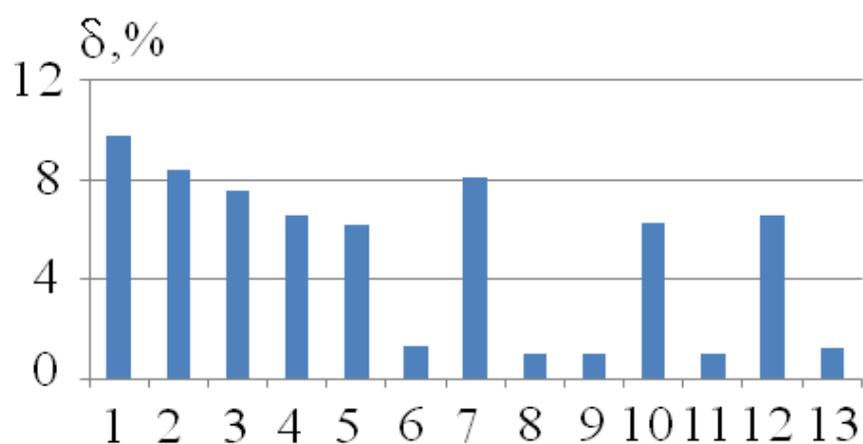


Рис.3 Погрешности определения концентрации гидразина. Пуассоновский закон распределения шума.

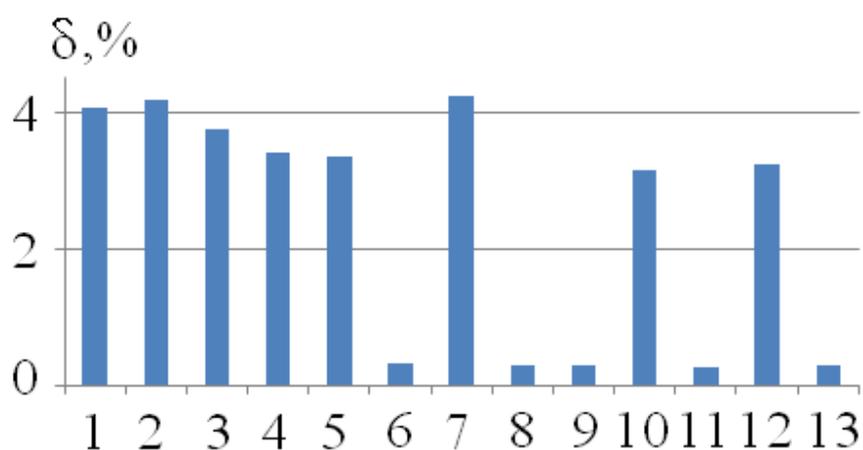


Рис.4 Погрешности определения концентрации аммиака. Пуассоновский закон распределения шума.

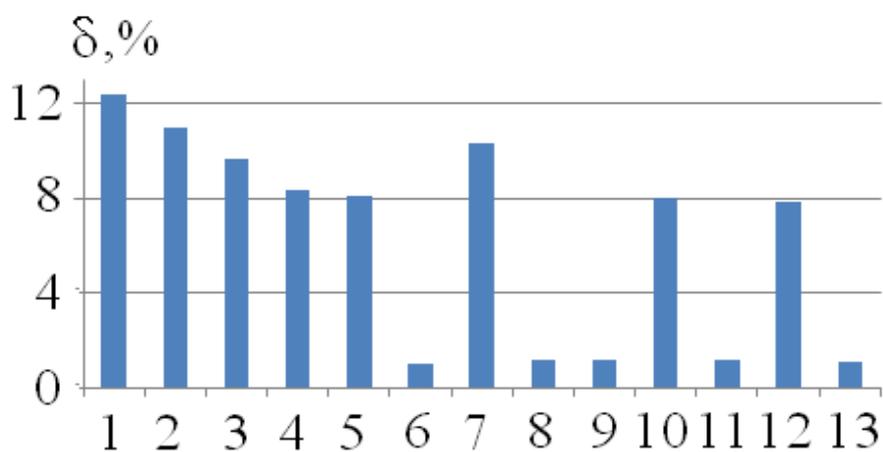


Рис.5 Погрешности определения концентрации метанола. Пуассоновский закон распределения шума.

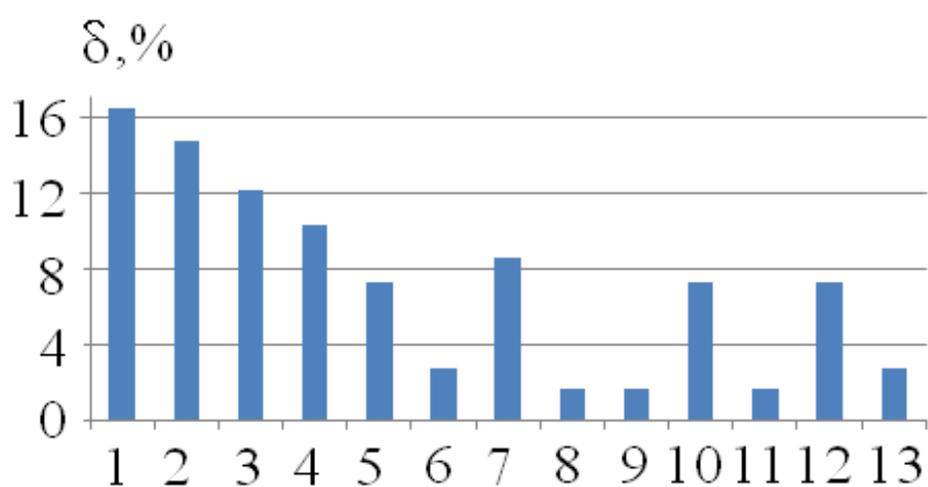


Рис.6 Погрешности определения концентрации этилакрилата. Пуассоновский закон распределения шума.

На рисунках 1-6: столбец 1 соответствует восстановленной концентрации при стандартном методе решения системы уравнений (1), столбец 2 – стандартному методу решения системы уравнений (1) с последующим усреднением по двум измерениям, столбец 3 – стандартному методу решения системы уравнений (1) с последующим усреднением по четырем измерениям, столбец 4 – стандартному методу решения системы уравнений (1) с последующим усреднением по шести измерениям, столбец 5 - соответствует концентрации определенной по методу наименьших квадратов (3), столбец 6 - восстановленной концентрации при функции невязки (9), столбец 7 - восстановленной концентрации при функции невязки (10), столбец 8 - восстановленной концентрации при функции невязки (11), столбец 9 - восстановленной концентрации при функции невязки (12), столбец 10 - восстановленной концентрации при использовании оценки Уэлша (для $c=1$), столбец 11 - восстановленной концентрации при функции невязки (13), столбец 12 - восстановленной концентрации при использовании оценки Германа-Маклара, столбец 13 - восстановленной концентрации при функции невязки (5) (для $p=1$).

На рисунках 7,8 приведены примеры аналогичных (приведенным на рисунках 1-6) результатов математического моделирования (для двух компонент смеси – этилена и этилакрилата) для шума измерения ξ_i с нормальным распределением. Измеряемый сигнал \tilde{y}_k в k -ом спектральном канале моделировался как

$$\tilde{y}_k = y_k(1 + \xi_i).$$

Для шума измерения среднее значение полагалось равным y_k , а относительное среднеквадратическое отклонение – 0,03.

Обозначения столбцов на рисунках 7 и 8 те же, что и на рисунках 1-6.

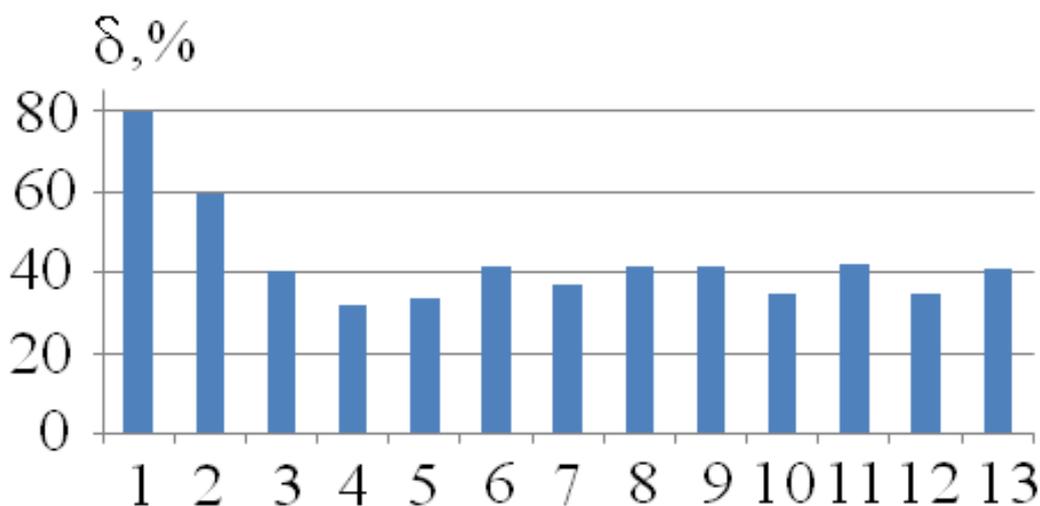


Рис.7 Погрешности определения концентрации этилена. Нормальный закон распределения шума.

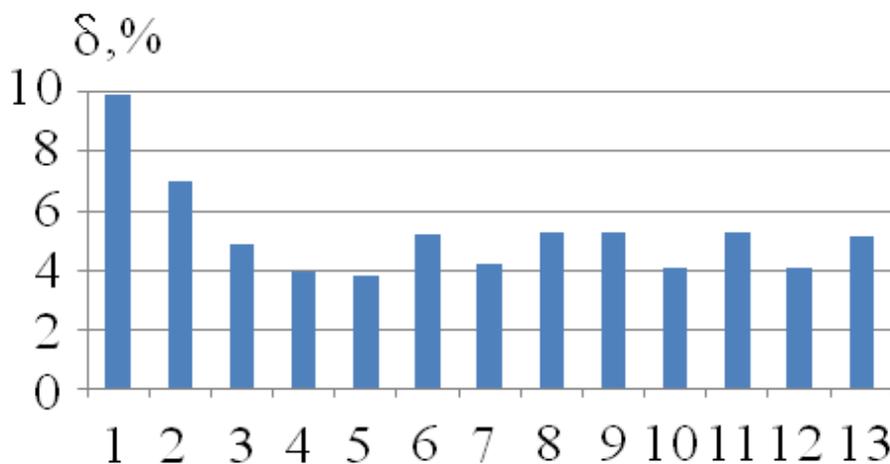


Рис.8 Погрешности определения концентрации этилакрилата. Нормальный закон распределения шума.

Из рисунков 1-6 видно, что часть описанных робастных оценок (функции невязки (9), (11) - (13) и функция невязки (5) для $p=1$) позволяет для задачи количественного лазерного газоанализа существенно снизить (по сравнению с усреднением по двум, четырем и шести измерениям и методом наименьших квадратов) погрешность определения концентрации газовых компонент при пуассоновском законе распределения шума (в условиях выбросов измеряемого сигнала).

В тоже время, в случае отсутствия выбросов измеряемого сигнала эти робастные оценки не вносят существенных дополнительных погрешностей. При шуме измерения с нормальным законом распределения их использование лишь немного увеличивает погрешности определения концентрации газов (по сравнению с усреднением и методом наименьших квадратов).

Наилучшей функцией невязки для используемой при математическом моделировании (для количественной оценки концентрации газов) многокомпонентной газовой смеси является функция невязки $\rho(x) = \arctg|x|$. Она обеспечивает наименьшие погрешности для первого газа смеси – этилена (погрешности восстановления концентрации этилена гораздо больше, чем для других газов – это связано с очень малым содержанием его в смеси).

Заключение

Таким образом, в статье впервые для задачи лазерного газоанализа проведен сравнительный анализ робастных методов восстановления количественного состава многокомпонентных стационарных газовых смесей из многоспектральных лазерных измерений. Определены наиболее эффективные с точки зрения минимизации погрешностей восстановления концентраций компонент газовой смеси робастные методы в условиях выбросов измеряемого лазерного сигнала.

Список литературы

1. Демтрёдер В. Современная лазерная спектроскопия: пер. с англ. М.: Интеллект, 2014. 1026 с.
2. Степанов Е.В. Диодная лазерная спектроскопия. М.: Физматлит, 2009. 416 с.
3. Городничев В.А. Разработка методов и оптико-электронных средств лазерного оперативного контроля многокомпонентных газовых смесей составляющих ракетных топлив и других токсичных веществ: дис. ... докт. техн. наук. М., 2009. 307 с.
4. Ольховой А.Ф. Обратные некорректные задачи. Введение в проблематику. Таганрог: Технологический институт ЮФУ, 2009. 132 с. Режим доступа: <http://mathemlib.ru/books/item/f00/s00/z0000013/index.shtml> (дата обращения 20.05.2015).
5. Kaipio J.P., Somersalo E. Classical regularization methods // In book: Statistical and Computational Inverse Problems. Springer New York, 2005. P. 7-48. DOI: [10.1007/0-387-27132-5_2](https://doi.org/10.1007/0-387-27132-5_2)
6. Neubauer A. Inverse and Ill-Posed Problems: Course. 2008 // Institute of Mathematics of the Polish Academy of Sciences: website. Available at: <http://www.impan.pl/BC/Arch/2008/08Neubauer.html> , accessed 20.05.2015.
7. Еременко Л.Н., Козинцев В.И., Городничев В.А. Метод байесовских оценок в задаче лазерного газоанализа // Известия вузов. Физика. 2008. № 9. С. 29-35.
8. Катаев М.Ю., Бойченко И.В. Программное и методическое обеспечение задач лидарного зондирования атмосферы. Томск: СТТ, 2007. 246 с.
9. Хиценко В.Е. Робастные методы оценивания. Новосибирск: НТГУ, 2008. 52 с.
10. Крянев А.В., Лукин Г.В. Метрический анализ и обработка данных. М.: Физматлит, 2010. 280 с.
11. Тырсин А.Н. Робастный метод построения зависимостей по экспериментальным данным // РФЯЦ – ВНИИТФ им. акад. Е.И. Забабахина: сайт. Режим доступа: <http://www.vniitf.ru/rig/konfer/8zst/s6/6c5.pdf>. (дата обращения 20.03.2015).
12. Грауэр Л.В., Архипова О.А. Робастные регрессионные модели. 2014 // Computer Science Center: сайт. Режим доступа: http://compscicenter.ru/media/slides/math_stat_2014_spring/2014_04_18_math_stat_2014_spring_1.pdf (дата обращения 20.05.2015).

Comparative Study of Gas Reconstruction Robust Methods for Multicomponent Gas Mixtures

V.A. Gorodnichev^{1,*}, T.K. Antonuk¹,
M.L. Belov¹, V.V. Nazarov¹

*gorod@bmgstu.ru

¹Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia

Keywords: laser, gas analysis, multicomponent gas mixtures, comparative study, robust method

When using laser methods of gas analysis, one of the arising problems is instability in results of defining a quantitative composition of gases under control of multicomponent mixes in the conditions of real noise of measurements. It leads to demand for using the special algorithms to process results of laser measurements.

For multicomponent gaseous mixes, when solving a problem of quantitative gas analysis based on the results of multispectral laser measurements, use of methods for solving incorrect mathematical tasks is efficient.

If mix is stationary (i.e. there is a possibility for a series of measurements) it is possible to use a much simpler method to determine concentration of gases, i.e. the least-squares method based on the minimization of residual function.

However, the estimates obtained by the least-squares method are effective if distribution of measurement errors is according to the normal law. In practice, the law of errors distribution is often non-normal, and loss of estimate efficiency achieved by the least-squares method occurs even at a small share of bursts.

With bursts available in the measuring signal, it is necessary to use the stationary estimation methods allowing the significantly reduced impact on the estimate of considerable bursts.

To estimate an efficiency of the robust methods for defining a quantitative composition of the multicomponent stationary gas mixes from multispectral laser measurements a mathematical simulation was performed. A gas mixture was considered to be stationary, and n measurements (at each wavelength) were taken (n were specified from 2 to 6) to define a quantitative composition of gases in the mixture. Simulation was implemented for gas mixes with the number of components from 4 to 6.

Results of mathematical simulation show that the robust estimate based on the residual function $\rho(x) = \arctg|x|$, allows us, in conditions of the bursts of a variable signal, to reduce significantly the error of determining concentrations of the gas mix components as compared to the averaging, by the least-squares method and other options of function $\rho(x)$.

References

1. Demtröder W. *Laser Spectroscopy. In 2 vols.* Springer Berlin Heidelberg, 2008. (Russ. ed.: Demtröder W. *Sovremennaya lazernaya spektroskopiya*. Moscow, Intellect Publ., 2014. 1026 p.).
2. Stepanov E.V. *Diodnaya lazernaya spektroskopiya* [Diode laser spectroscopy]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2009. 416 p. (in Russian).
3. Gorodnichev V.A. *Razrabotka metodov i optiko-elektronnykh sredstv lazernogo operativnogo kontrolya mnogokomponentnykh gazovykh smesei sostavlyayushchikh raketnykh topliv i drugikh toksichnykh veshchestv. Dokt. dis.* [Development of methods and opto-electronic means of laser operational control of multicomponent gas mixtures the components of rocket fuels and other toxic substances. Dr. dis.]. Moscow, 2009. 307 p. (in Russian, unpublished).
4. Ol'khovoi A.F. *Obratnye nekorrektnye zadachi. Vvedenie v problematiku* [Inverse ill-posed problems. Introduction]. Taganrog, Institute of Technology of Southern Federal University Publ., 2009. 132 p. Available at: <http://mathemlib.ru/books/item/f00/s00/z0000013/index.shtml> , accessed 20.05.2015. (in Russian).
5. Kaipio J.P., Somersalo E. Classical regularization methods. In book: *Statistical and Computational Inverse Problems*. Springer New York, 2005, pp. 7-48. DOI: [10.1007/0-387-27132-5_2](https://doi.org/10.1007/0-387-27132-5_2)
6. Neubauer A. *Inverse and Ill-Posed Problems: Course*. 2008. Institute of Mathematics of Polish Academy of Sciences: website. Available at: <http://www.impan.pl/BC/Arch/2008/08Neubauer.html> , accessed 20.05.2015.
7. Eremenko L.N., Kozintsev V.I., Gorodnichev V.A. Method of Bayesian estimates in the problem of laser gas analysis. *Izvestiya vuzov. Fizika*, 2008, no. 9, pp. 29-35. (English version of journal: *Russian Physics Journal*, 2008, vol. 51, no. 9, pp. 912-918. DOI: [10.1007/s11182-009-9135-5](https://doi.org/10.1007/s11182-009-9135-5)).
8. Kataev M.Yu., Boichenko I.V. *Programmnoe i metodicheskoe obespechenie zadach lidarnogo zondirovaniya atmosfery* [Software and methodical maintenance of problems of lidar sensing of atmosphere]. Tomsk, STT Publ., 2007. 246 p. (in Russian).
9. Khitsenko V.E. *Robastnye metody otsenivaniya* [Robust estimation methods]. Novosibirsk, NTSU Publ., 2008. 52 p. (in Russian).
10. Kryanev A.V., Lukin G.V. *Metricheskii analiz i obrabotka dannykh* [Metric analysis and data processing]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2010. 280 p. (in Russian).
11. Tyrsin A.N. *Robastnyi metod postroeniya zavisimostei po eksperimental'nym dannym* [Robust method for constructing dependency on experimental data]. Zababakhin All-Russian Scientific Research Institute of Technical Physics: website. Available at: <http://www.vniitf.ru/rig/konfer/8zst/s6/6c5.pdf> , accessed 20.03.2015. (in Russian).
12. Grauer L.V., Arkhipova O.A. *Robastnye regressionnyye modeli* [Robust regression models]. 2014. Computer Science Center: website. Available at: http://compscicenter.ru/media/slides/math_stat_2014_spring/18_math_stat_2014_spring_1.pdf , accessed 20.05.2015. (in Russian).